

# Tunnelspektroskopie in Metall-Oxid-Halbleiter-Strukturen

Lautz, Günter

Veröffentlicht in:  
Abhandlungen der Braunschweigischen  
Wissenschaftlichen Gesellschaft Band 37, 1985,  
S.7-29



Verlag Erich Goltze KG, Göttingen

## **Tunnelspektroskopie in Metall-Oxid-Halbleiter-Strukturen\*)**

Von **Günter Lautz**, Braunschweig

(Eingegangen am 14.1.1985)

Als Eduard Justi 1946 die Leitung des an der Technischen Hochschule Braunschweig neu gegründeten Instituts für Technische Physik übernommen hatte, zeigte sich sehr schnell, daß hier ein Hochschullehrer berufen worden war, der sich um die enge Verbindung von reiner Grundlagenforschung mit der technischen Nutzung neuer wissenschaftlicher Erkenntnisse in besonderer Weise bemühte. Hatte er schon mit seinen früheren thermodynamischen und reaktionskinetischen Arbeiten den in diesen Bereichen tätigen Ingenieuren wichtige und neuartige physikalische Grunddaten geben können, setzte Herr Justi in Braunschweig seine in Berlin mit Weiterbildungsveranstaltungen der Elektroingenieure erfolgreich realisierten intensiven Bestrebungen um eine Kooperation mit der Elektrotechnik in der klaren Einsicht fort, daß die Studierenden dieses Fachgebietes mit der weiteren Entwicklung ihrer Disziplin ein ungleich größeres Grundwissen physikalischer Zusammenhänge für ihre spätere Tätigkeit benötigen würden, aber auch Physiker nicht ausschließlich die Wissenschaft um ihrer selbst willen betreiben sollten. So wurde in Braunschweig die Vorlesung „Elektronen und Ionen“ als Pflichtveranstaltung für Physik- und Elektrotechnikstudenten eingeführt.

Das Thema „Elektronen und Ionen“ umfaßte für Herrn Justi systematisch und breit angesetzte Untersuchungen über alle Arten elektrischer Transportvorgänge in festen und flüssigen Stoffen, so z.B. die Leitungsmechanismen in Metallen (Elektronen), in Halbleitern (Elektronen und Defektelektronen), in Supraleitern (Elektronen (Cooper)-Paare) oder in Brennstoffzellen (Ionen). In allen diesen, zu den Schwerpunkten seines wissenschaftlichen Bemühens gehörenden Spezialgebieten hat Herr Justi neben beachtenswerten Forschungsergebnissen mehr als einer Generation von Mitarbeitern vielfältige Anregungen zur Methodik des wissenschaftlichen Arbeitens gegeben, die viele seiner Schüler ihrerseits aufgegriffen und zur Maxime ihres eigenen beruflichen Handelns gemacht haben. Insoweit prägt die Justi'sche Art, physikalische Untersuchungen durchzuführen, auch noch Arbeiten, die, wie die nachstehend beschriebenen, dem eigentlichen Themengebiet seiner Interessen entwachsen sind.

Eduard Justi hat schon gegen Ende der 30er Jahre die „Praktiker“ immer wieder darauf hingewiesen, daß eine eingehende Beschäftigung mit der Atomistik des La-

---

\*) Niederschrift eines Vortrages, den der Autor am 22. Juni 1984 mit dem Untertitel „Was aus Anregungen von Herrn Justi werden kann“ auf dem Festkolloquium für Herrn Justi anläßlich der Vollendung seines 80. Lebensjahres gehalten hat.

dungstransports dringend geboten sei und dazu auch dann experimentelle Untersuchungen sinnvoll und notwendig sein können, wenn unzureichende, aber als solche nicht erkannte, theoretische Modellaussagen den negativen Ausgang eines Versuchs postulieren. So hat Herr Justi seine fundamentalen Ergebnisse über die magnetische Widerstandsänderung der Metalle gefunden, ohne sich seinerzeit von dem Verdikt der klassischen Elektronentheorie beirren zu lassen, daß ein solches Phänomen – wenn vorhanden – doch verschwindend klein sein sollte. Auch die von U. KUNZE und mir vor einigen Jahren begonnenen und inzwischen erfolgreich weitergeführten Untersuchungen des Tunneleffektes an MOS (Metal-Oxide-Semiconductor)-Strukturen mit nichtentartetem Halbleitersubstrat wurden von Experten hinsichtlich ihrer Realisierbarkeit zunächst skeptisch beurteilt. Eingedenk der Justi'schen Art der Vorgehensweise haben wir uns nicht abschrecken lassen.

In dem Vorwort zu dem 1948 erschienenen Buch „Leitfähigkeit und Leitungsmechanismus fester Stoffe“ [1] hat Herr Justi einige Prinzipien formuliert. So sollten z. B. in einer wissenschaftlichen Darstellung nicht zu viel ungeklärte Einzelheiten gebracht werden – Zusammenhänge sind wichtiger; auch sollte man sich davor hüten, Grundlagenforschung ausschließlich mit möglichen technischen Anwendungen zu rechtfertigen; daher wurden im Justi'schen Institut schon Veränderungen der elektrischen Leitungsvorgänge in dünnen Schichten durch Oberflächeneinflüsse und damit auftretende Begrenzungen der freien Elektronenweglänge systematisch untersucht, bevor die Mikroelektronik heute Kenntnisse dieser Art benötigte. Max von Laue betont seinerseits in einem zweiten Vorwort zu dem genannten Buch, daß dessen Vorzug darin bestehe, experimentelle Ergebnisse zu sichten und zu ordnen; auch das war eine Justi'sche Forderung an sich selbst.

Ein besonderes Anliegen hat Herr Justi seinen Mitarbeitern immer wieder nahegebracht: Die Veranschaulichung physikalischer Gedanken und Zusammenhänge durch Modelle oder Modellvorstellungen, die auch dem Fachfremden den Zugang zu schwierigen Überlegungen erleichtern und erste Einsichten eröffnen. Natürlich bedeutet dieses Bemühen meist eine Vereinfachung der Gegebenheiten, die oft als unzulässig angesehen und kritisiert wird, die aber sicher gerechtfertigt werden kann, wenn man sich der Grenzen der Anwendbarkeit bewußt bleibt und diese nicht überschreitet. Nicht jedem ist es gegeben, sich unter der quantenmechanischen  $\psi$ -Funktion etwas vorzustellen; und wenn Nichtfachleute einen Eindruck von ihrer Aussagekraft und Auswirkung gewinnen sollen, ist ihre „bildhafte“ Darstellung eine nützliche Hilfe. In diese Richtung zielen auch Justi's Empfehlungen zur bildhaften oder gegenständlichen Demonstration.

Justi's Anregungen waren im Generellen weitgehend, im Speziellen vielseitig; das sollen auch die folgenden Ausführungen zum fachlichen Thema dieser Abhandlung verdeutlichen. Ich wende mich dabei an den Nichtspezialisten, in der Formulierung Justi'sche Empfehlungen beachtend; der Sachkundige möge Nachsicht üben oder sich aus Randbemerkungen und Zwischentönen zu eigenem vertieften Weiterdenken anregen lassen.

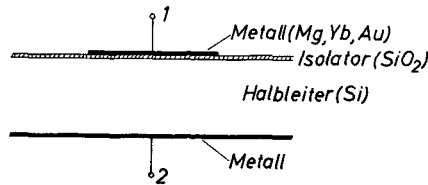


Bild 1:

*Schnitt einer konventionellen Metall-Isolator-Halbleiter(Semiconductor)-Tunnel-Struktur mit Anschlußelektroden 1, 2 und Stromzuführung über das Substrat.*

Den materiellen Gegenstand der Betrachtungen bildet die Schichtanordnung Metall, Isolator, Halbleiter mit sperrfreiem metallischem Gegenkontakt (Bild 1). Das Deckmetall soll, wie z.B. Ti, Mg oder Yb, eine Elektronenaustrittsarbeit haben, die kleiner als die Elektronenaffinität des verwandten Halbleiters bleibt, so daß im thermodynamischen Gleichgewicht Elektronen vom Deckmetall zum Halbleiter gewandert sind, im Fall eines n-Typ-Halbleiters eine Anreicherungsrandschicht und im Fall eines p-Halbleiters eine Inversionsschicht mit Elektronenleitung bilden können, die vom Halbleitersubstrat durch eine Sperrschicht getrennt ist. Als Halbleiter dient Si mit unterschiedlicher kristallografischer Grenzflächenorientierung, als Isolator aufgewachsenes SiO<sub>2</sub>. Wenn die Schichtdicke des SiO<sub>2</sub> kleiner als 5 nm wird, tritt schon bei der Elektronenwanderung für die Einstellung des thermodynamischen Gleichgewichtes, aber auch beim Anlegen einer relativ zum Halbleiter negativen äußeren Spannung an die Deckelektrode der quantenmechanisch deutbare „Tunneleffekt“ auf, ein Phänomen, dessen Namensgebung im Justi'schen Sinne das physikalische Geschehen anschaulich macht: Elektronen sind ohne Energieänderungen befähigt, eine Barriere, einen Potentialberg, den der Isolator darstellt, zu durchtunneln. Elektrotechnisch liegt in der Anordnung von Bild 1 eine Reihenschaltung von Tunnelwiderstand und Halbleiterbahnwiderstand vor. Der Tunneleffekt, so lernte man schon vor Jahrzehnten bei Herrn Justi, hat in der Praxis für die elektrischen Relaiskontakte eine große Bedeutung, ist es doch den Ladungsträgern nur in dieser Weise möglich, die mechanisch stabilen, sehr dünnen Schmutzschichten auf den Kontaktelektroden zu durchdringen.

Der konventionelle Aufbau einer Tunnelstruktur nach Bild 1 hat für systematische Untersuchungen des Tunneleffektes den großen Nachteil, daß insbesondere bei sehr tiefen Temperaturen der Halbleiterbahnwiderstand dominiert und den Gesamtwiderstand bestimmt. Die Anwendung der für Si entwickelten Planartechnik ermöglicht eine Versuchsprobenstruktur, die im Prinzip einem Feldeffekt-Transistor (FET) mit den Stromzu- und -abführungen (Source und Drain) und einer Steuerelektrode (Gate) (Bild 2) nachgebildet ist. Für Tunnel-Experimente sind die Stromelektroden miteinander zu verbinden, unter der Steuerelektrode muß die Oxiddicke unter 5 nm bleiben, und die gut leitenden n<sup>+</sup>-Wannen müssen genügend dicht an den Inversionskanal angrenzen, um Bahnwiderstände gegenüber dem Tunnelwiderstand weitgehend zu unterdrücken.

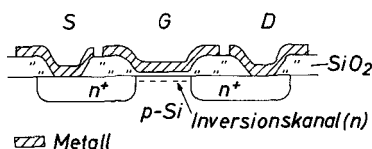


Bild 2:

Schnitt einer MOS-Struktur mit p-Si als Substrat in Planartechnik. S = Source-Elektrode, G = Gate (Steuer)-Elektrode, D = Drain-Elektrode.  $n^+$  = eindiffundierte, gut leitende, mit P dotierte Wannen.

Zu einer genaueren Erfassung des Elektronen-Tunneleffektes in einer MOS-Struktur sollen die energetischen Verhältnisse in Abhängigkeit von einer Ortskoordinate senkrecht zur Schichtebene gemäß Bild 3 näher erläutert werden. Im Metall sind im Leitungsband alle erlaubten Energiezustände bei tiefen Temperaturen bis zu einer Grenzenergie, Fermi-Energie  $E_F$  oder chemischen Potential der Elektronen genannt, aufgefüllt. Im Isolator, so läßt sich grob vereinfacht in diesem Zusammenhang formulieren, gibt es keine frei beweglichen Elektronen, in einem klassischen n-Typ-Halbleiter existieren freie Elektronen oberhalb der Unterkante des Leitungsbandes  $E_L$  in einer relativ zu Metallen geringen Dichte. Infolge der bereits erwähnten Elektronenwanderung vom Metall zum Si und der geringen Trägerkonzentration im Halbleiter entsteht

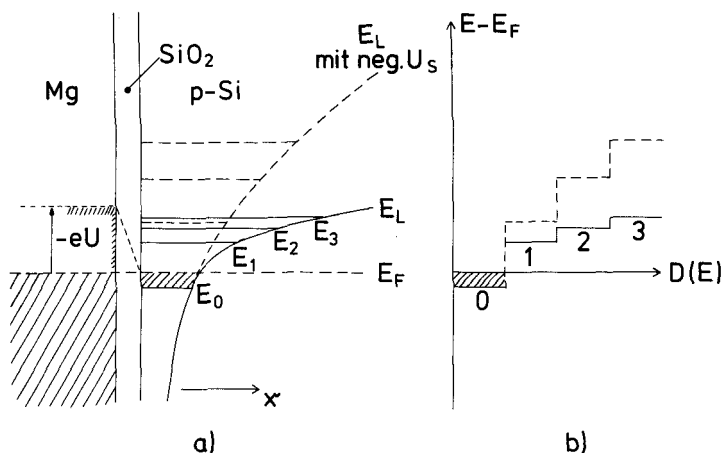


Bild 3:

a) Energiebändermodell einer MOS-Struktur auf einer (111)-Grenzfläche im thermodynamischen Gleichgewicht bzw. mit negativ gegenüber dem Halbleiter vorgespannter Metallelektrode.  $U$  = Spannung zwischen Metall und Halbleiter,  $E_F$  = Fermi-Energie,  $E_0, E_1, E_2, \dots$  = Energiewerte der Unterkanten von Subbändern,  $E_L$  = Energie der Unterkante des Leitungsbandes ohne bzw. mit zusätzlich zwischen Halbleitersubstrat und Inversionskanal angelegter Substratspannung  $U_s$ ,  $x$  = Ortskoordinate senkrecht zur Oberfläche.

b) Zusammenhang zwischen der elektronischen Zustandsdichte pro Fläche  $D(E)$  und den auf die Fermi-Energie bezogenen Kantenenergien nach a) ohne und mit Substratspannung [2,7].

in dessen Randschicht ein elektrisches Feld, das den Konzentrationsausgleich in diesem Materialteil verhindert. Das zu dem elektrischen Feld gehörende elektrische Potential wird ortsabhängig und verursacht bei allen elektronischen Halbleiterenergiewerten einen additiven elektrostatischen Energieanteil, der den Verlauf der Kantenenergie  $E_L(x)$  bestimmt. Bei hinreichend hoher Elektronenrandkonzentration, d.h. bei genügend niedriger Austrittsarbeit des Deckmetalles, ist dieser Einfluß so stark, daß nach Bild 3 der Leitungstyp des p-Si in einer dünnen Kanalzone invertiert wird. Da im thermodynamischen Gleichgewicht auch in dieser Halbleiterrandzone die erlaubten Energiezustände bis zum gleichen Fermi-Niveau  $E_F$  wie im Metall besetzt werden, entsteht eine Art Potentialtrichter, der senkrecht zur Grenzflächennormalen in allen Richtungen die gleiche Gestalt besitzt.

Die Ausdehnung des Trichters in x-Richtung ist so gering, daß bei konsequenter Anwendung der Quantentheorie die Elektronenbewegung senkrecht zur Grenzfläche quantisiert und nicht mehr durch den Verlauf  $E_L(x)$  in ihren Minimalwerten gegeben wird. Die erlaubten Zustände im Leitungsband des Si mit  $E > E_L$  spalten in Subbänder mit den Unterkanten  $E_0, E_1, E_2 \dots E_n$  (Bild 3) auf; die  $E_n$  stellen die potentiellen Energiewerte dar, zu denen sich die kinetischen Anteile infolge einer Trägerbewegung parallel zur Grenzfläche addieren. Daher sind die  $E_n$  Kantenenergien, und die Zustände der einzelnen Subbänder überlappen sich mit steigenden E-Werten.

Versucht man, um wieder einer allgemeinen Anregung Justi's zu folgen, diese Resultate in einem anschaulichen Modell zu erfassen, könnte man die in der Halbleiterrandschicht einzulagernden Elektronen als „Bälle“ mit endlichem Durchmesser ansehen. Da oberhalb  $E_L$  die Elektronen auch im Halbleiter beweglich sind, ist es nicht unvernünftig, den Balldurchmesser durch die Elektronenwellenlänge zu approximieren. Nach de Broglie ist deren Betrag gleich  $h/(mv)$  ( $h$  = Planck'sches Wirkungsquantum,  $m$  = Elektronenmasse,  $v$  = Elektronengeschwindigkeit). Der niedrigst mögliche besetzbare Elektronenzustand liegt auf der Energieskala an der Stelle, wo die Trichteröffnung gerade gleich dem Balldurchmesser (Elektronenwellenlänge) ist; dieser Wert wird in Bild 3a mit  $E_0$  bezeichnet. Im folgenden lassen sich weitere Elektronen („Bälle“) über dem ersten ohne Problem einlagern: Das entspricht dem untersten Subband mit einer konstanten Zustandsdichte. Von einem bestimmten Energiewert ( $E_1$ ) an, passen zwei „Bälle“ nebeneinander, hier kann ein zweiter Ballstapel begonnen werden; so entsteht das zweitniedrigste Subband usw.

Offensichtlich hängt nach Bild 3 die Lage der  $E_n$ -Werte vom  $E_L(x)$ -Verlauf ab, der bei der planaren Anordnung nach Bild 2 durch eine Spannung zwischen Halbleiter-substrat (p-Typ) und leitender Kanalzone (n-Typ) beeinflussbar ist (Bild 3 und 5). Durch eine negative Substratspannung  $U_s$  wird der pn-Übergang zwischen Kanal und Halbleitervolumen in Sperrichtung belastet, die Verarmungsladung der Sperrschicht nimmt zu, der Potentialtrichter erhält eine steilere Flanke, die Kantenenergien  $E_n$  wachsen an (Bild 3).

Daß die bisher beschriebene Aufspaltung des Leitungsbandes in Subbänder auch praktische Konsequenzen haben kann, ist offenkundig. So kann der Ladungstransport in den MOSFET's bei hinreichend kleinen Kanalabmessungen infolge einer Art Mehr-

(sub)bänderleitung verändert werden. Besondere Bedeutung dürfte diesen Phänomenen bei den stark in der Entwicklung stehenden Heteroübergängen zukommen.

Im Fall des Si ist unter leicht realisierbaren Bedingungen im thermodynamischen Gleichgewicht nur das unterste Subband besetzt (Bild 3). Legt man an die metallische Deckelektrode relativ zum Halbleiter eine negative Spannung ( $U$ ) an, tunneln Elektronen vom Metall zum Si durch das  $\text{SiO}_2$ , sofern bei konstanter Energie diesen Elektronen auf der Halbleiterseite freie, aber besetzbare Zustände gegenüberstehen. Dieser Tunnelstrom  $I$  hängt von der Durchtrittswahrscheinlichkeit der Elektronen (Dicke der  $\text{SiO}_2$ -Schicht, Höhe der Potentialbarriere etc.) und der Zustandsdichte im Si ab. Erreicht  $-eU$  ( $e$  = Elementarladung) einen Kantenwert  $E_n$ , wird sozusagen ein neuer zusätzlicher „Kanal“ für den Tunnelstrom eröffnet (Bild 3 und 4), der differentielle Leitwert  $dI/dU$  steigt stufenartig an, die  $I(U)$ -Kennlinie zeigt einen Knick und die zweite Ableitung  $d^2I/dU^2$  als Funktion von  $U$  ein deutliches Minimum (Bild 4). Da durch Variation der Spannung  $U$  in dieser Weise bei tiefen Temperaturen Subbandkantenenergien detektierbar sind, spricht man von Tunnelspektroskopie.

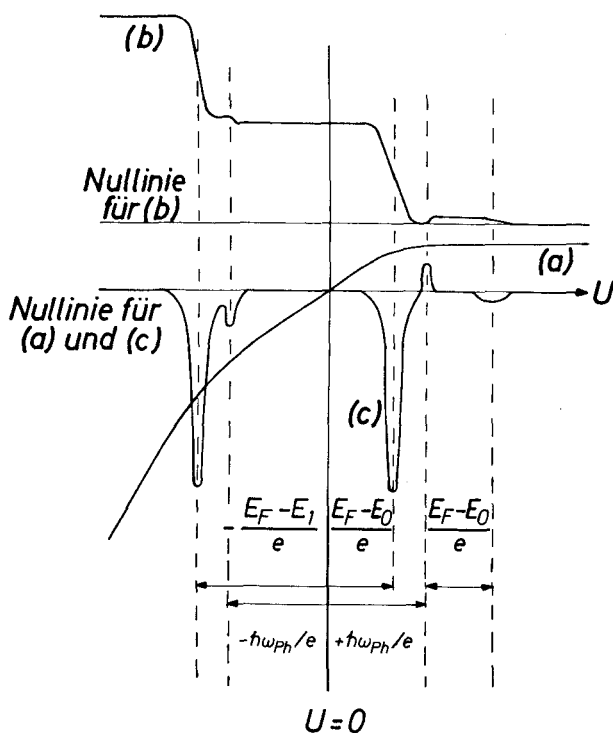


Bild 4:

Schematische Verläufe der Strom-Spannungskennlinien  $I(U)$  (a) für eine MOS-Tunnelstruktur, deren erster Ableitung  $dI/dU$  (b) und zweiter Ableitung  $d^2I/dU^2$  (c).  $E_F$  = Fermi-Energie,  $E_0, E_1$  = Kantenenergien der niedrigsten Subbänder,  $\hbar\omega_{ph}$  = Energie eines Phonons der Frequenz  $\omega_{ph}$  [2].

Interessant und für Bahnwiderstandskorrekturen wichtig ist, daß auch Phononen, also quantisierte Gitterschwingungen im Si, besondere Kennlinienstrukturen hervorrufen. Jedes tunnelnde Elektron (der Energie  $E_F$ ), das eine Gitterschwingung der Frequenz  $\omega_{Ph}$  anregt, also ein Phonon  $\hbar\omega_{Ph}$  ( $\hbar \equiv h/(2\pi)$ ) emittiert, und nach der Energieabnahme um  $\hbar\omega_{Ph}$  noch auf einen freien Zustand trifft, eröffnet wieder einen zusätzlichen „Tunnelkanal“. Der differentielle Leitwert steigt bei diesen Energiewerten für beide Spannungspolaritäten an, das bedeutet im  $d^2I/dU^2$ -Verlauf für  $U < 0$  ein Minimum, für  $U > 0$  ein Maximum (Bild 4). Im Gegensatz zu den  $E_n$ -Werten liegen diese Extrema unabhängig von der Substratspannung  $U_S$  fest, können so identifiziert, also durch elektrische Messungen bestimmt und zur Korrektur von Bahnwiderstandsanteilen benutzt werden. Bei positiven Spannungen  $eU > E_F - E_0 + \hbar\omega_{Ph}$  versiegt die durch Phononenemission entstandene zusätzliche Leitfähigkeit, weil alle Elektronen dann tunneln können; dadurch entstehen die in Bild 4 ganz rechts angedeuteten „Echostrukturen“ [2].

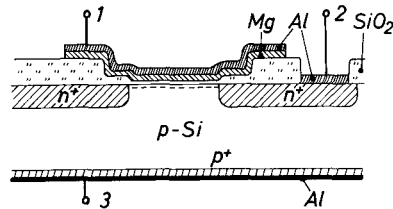


Bild 5:

Schnitt einer MOS-Struktur mit p-Si als Halbleiter mit selbstjustierender Planartechnologie für tunnelspektroskopische Untersuchungen auf nichtentartetem Substrat nach KUNZE [2, 5]. 1 und 2: Anschlüsse für die Tunnelstrecke, 3: Substrat-Elektrode,  $n^+$  bzw.  $p^+$  = gut leitende Bereiche hoher P- bzw. B-Dotierung.

Die Realisierung der bisher nur gedanklich erörterten Phänomene und die quantitative Erfassung der physikalischen Zusammenhänge sind im Falle eines nichtentarteten Halbleitersubstrats von der Verringerung der Bahnwiderstände und der Kontaktwiderstände zwischen  $n^+$ -Wannen und Inversionskanal abhängig. Alle früheren Veröffentlichungen anderer Autoren (z.B. InAs [3], PbTe [4]) beschreiben Tunnelexperimente mit einem bei tiefen Temperaturen noch gut leitenden entarteten Material; in diesem Fall ist aber wegen der energetisch hohen Besetzung der Elektronenzustände im Halbleiter ein eventuell vorhandener Potentialtopf und die damit verknüpfte Subbandbildung nicht ausmeßbar. Durch eine geschickte Modifikation des Aufbaus der Tunnelstrukturen und die dazu notwendigen abgewandelten technologischen Prozeßschritte ist es U. KUNZE [2] gelungen, erstmalig Tunnelstromkennlinien von nichtentartetem Si aufzunehmen und eine rein elektrische Bestimmung der Subbandkantenenergien durchzuführen. Die entscheidende Idee und die dazugehörigen Prozeßschritte bestanden darin, nach der Eindiffusion der hochleitenden  $n^+$ -Wannen für die Herstellung des dünnen und porenfreien Tunneloxids in dem zuvor vorhandenen relativ dicken  $SiO_2$  eine Öffnung freizuzätzen, deren Ränder mit den  $n^+$ -Wannen über-



lappen. Bei der anschließenden Tunneloxiderzeugung wächst das Oxid wegen des hohen Störstellengehaltes der Wannenbereiche über diesen Gebieten schneller und wird somit bei fester Oxidationszeit dicker als der für das Tunneln verwandte Mittenbereich (Bild 5). Bei dieser die Tunnelfläche selbstjustierenden Prozeßführung wird das Oxid in den Randbereichen über den  $n^+$ -Wannen hinreichend dick, um ein direktes Tunneln in die  $n^+$ -Zonen zu verhindern [2,5,6]. Da das Oxid andererseits an den Kontaktbereichen zwischen  $n^+$ -Wannen und Kanal dünner als in den Außengebieten ist, bleibt die Elektronenanreicherung hier im Vergleich zu einem einheitlich dicken Oxid größer: der Kontaktwiderstand nimmt ab. Außerdem werden durch die in Bild 6 dargestellte Aufteilung der Gesamttunnelfläche in 5 Einzelbereiche die Stromwege im Kanal verkürzt und der Einfluß des Bahnwiderstandes abermals verringert [2].

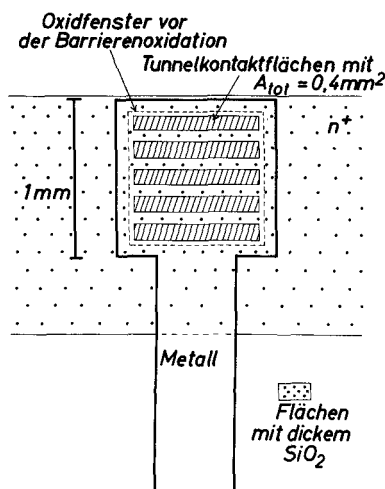


Bild 6:

Maßstabgerechte Aufsicht einer Versuchsprobe nach Bild 5 [2,7].

Bild 7 zeigt die experimentell mittels eines Modulations-Verfahren [8] an einer repräsentativen Probe gemessene Abhängigkeit des differentiellen Leitwertes von der an der Tunnelstrecke liegenden Spannung für zwei verschiedene Substratspannungen, die bei +2 V eine quasiakkumulierte Randschicht und bei -20 V eine deutlich ausgeprägte Inversionsschicht erzeugen [2,5]. Abgesehen von einer hier nicht weiter diskutierten Nullpunktsanomalie sind zumindest in der Kurve b zwei Stufen gut und eine weitere schwach erkennbar. Ungleich besser lassen sich die Kennlinienstrukturen in der zweiten Ableitung  $d^2I/dU^2$  für die gleiche Probe nach Bild 8 bis 10 beobachten und auswerten [5]. Im positiven Spannungsbereich ist jeweils nur eine Kurve für einen Substratspannungswert aufgezeichnet worden, weil hier  $U_s$  nur einen unwesentlichen Einfluß hat, das Maximum bei ca. 60 mV entspricht einer Phononenstruktur. Im Bereich negativer Spannungen ist die Substratspannungsvariation im Sinne einer Ver-

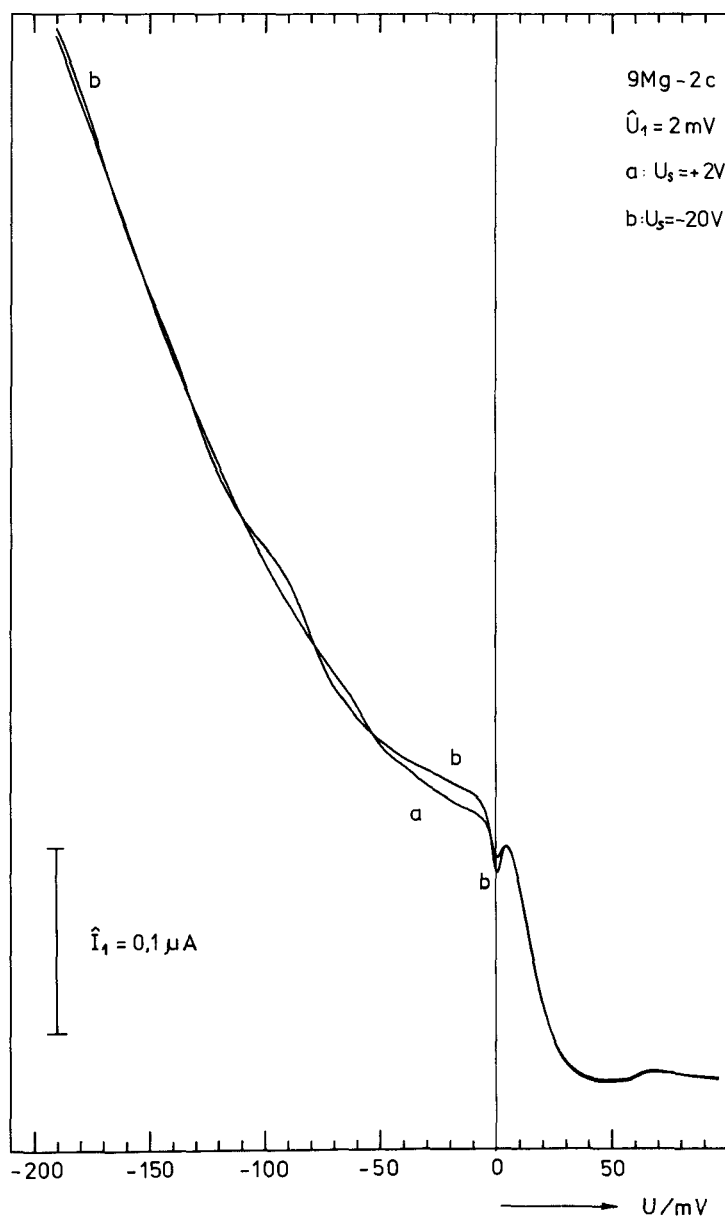


Bild 7:

Differentieller Leitwert einer Probe mit einem Inversionskanal auf einer (111)-Si-Fläche mit den Substratspannungen  $U_s = +2 \text{ V}$  und  $-20 \text{ V}$  als Funktion der Gleichspannung  $U$  nach [2, 5].  $\hat{U}_1 =$  Amplitude der der Gleichspannung  $U$  überlagerten Modulations-Meßspannung der Frequenz  $\omega$ ,  $\hat{I}_1 = (dI/dU)_U \hat{U}_1$ .  $T = 4,2 \text{ K}$ .

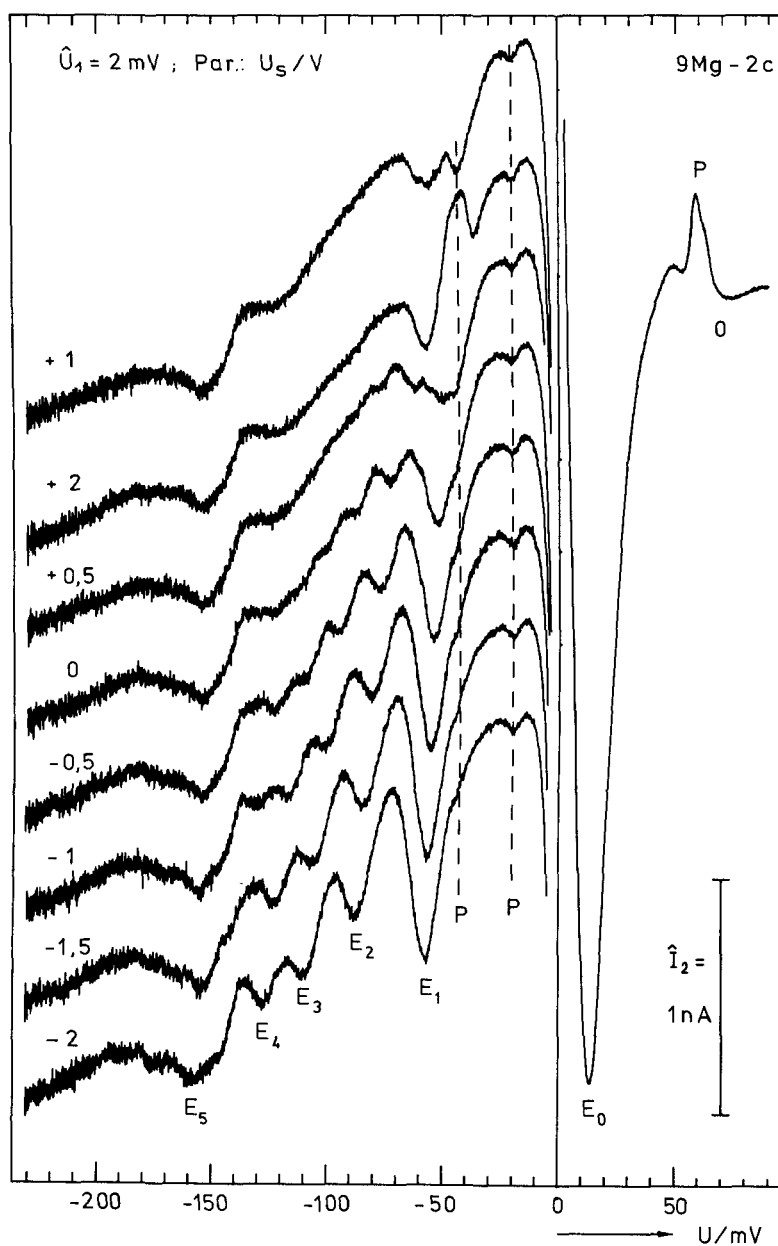


Bild 8:

Spannungsabhängigkeit der zweiten Ableitung der Strom-Spannungskennlinien der Probe von Bild 7 nach [5]. Parameter: Substratspannung  $U_s$ .  $P \triangleq$  durch Phononen erzeugte Struktur,  $\hat{I}_2 = (d^2 I / dU^2)_U \cdot 1/4 \hat{U}_1^2$ ,  $T = 4,2$  K.

schiebung der Kantenenergien, die den Positionen der Minima zuzuordnen sind, gut erfassbar und von den festliegenden Strukturen der Phononen, z.B. bei  $-20$  mV und  $-44$  mV, unterscheidbar [2, 6]. In dieser Weise konnten mit Hilfe des Tunneleffektes an einzelnen Proben bis zu 16 Subbänder gefunden werden.

Dabei erweist sich die Tunnelspektroskopie in verschiedener Hinsicht den optischen Untersuchungen von Subbändern im fernen Ultrarot als überlegen. Mit dieser Methode kann man in nichtgefüllte, energetisch hochliegende Subbänder unterschiedlicher Energiesteilflächen tunneln, ohne daß Auswahlregeln diese Übergänge einschränken, Energieänderungen durch exzitonische Effekte und Depolarisationserscheinungen bei resonanter Polarisation des Elektronengases auftreten. Ein gewisser, aber nicht sehr gewichtiger Nachteil der Tunneleffektmessungen liegt in der Veränderung der Elektronendichte mit der Meßspannung.

Die Zuordnung der Kantenenergien zu den Minima der  $d^2I/dU^2$ -Verläufe ist im Fall der Bilder 8–10 noch relativ einfach, weil bei der (111)-Orientierung der Si-Grenzfläche nur eine Subbandleiter entsteht. Bei positiven Spannungen entspricht das Minimum dem niedrigsten, teilweise besetzten Subband 0 mit dem unteren Grenzwert  $E_0$ . Die mit abnehmender Spannung im negativen U-Bereich auftretenden Minima korrespondieren in ihrer Aufeinanderfolge  $E_1, E_2, E_3$  usw. Da sich die Substratspannung  $U_s$  nach einfachen und bekannten Formeln in die Verarmungsladungsdichte umrechnen läßt [2], erhält man aus den Bildern 8 bis 10 die in Bild 11 dargestellte Abhängigkeit der Subbandkantenenergien von  $N_{\text{depl}}$ ; deutlich ist die schon eingangs besprochene Zunahme der  $E_n$ -Werte mit einer der Zunahme von  $N_{\text{depl}}$  korrelierenden Verringerung der Potentialtopfbreite in der Randschicht feststellbar [5].

Bei einer andersartigen kristallografischen Orientierung, z.B. schon bei Oberflächen senkrecht zur [100]-Richtung kann die Identifikation der Minima in den  $d^2I/dU^2$ -Kennlinienfeldern eine ungleich subtilere Aufgabe sein, weil sich dann in der Si-Grenzfläche nicht mehr alle mit Elektronen besetzbaren Energiezustände gleichartig verhalten. Der Grund dafür beruht auf der dem Fachmann geläufigen Anisotropie und der auch im Volumen des Si existenten Aufteilung des Leitungsbandes. Bei einer Darstellung im Impulsraum liegen alle möglichen Zustände der freien Leitungselektronen innerhalb der sogenannten Brillouinzone, die beim Si einen regelmäßigen Vielflächener aus Oktaeder- und Würfelflächen bildet. Die Minimalwerte der Energie ( $E_L$ ) befinden sich im Abstand der 0,85-fachen halben Distanz gegenüberliegender Würfelflächen auf den Achsen eines kartesischen Koordinatensystems.

Die den Minima benachbarten Flächen konstanter Energie sind 6 Rotationsellipsoide mit den kartesischen Achsen als Rotationsachsen und den Mittelpunkten in  $E_L$ . Die Konturen, die sich beim zentralen Schnitt der Brillouinzone mit einer (111)-bzw. (100)-Ebene ergeben, sind in Bild 12 skizziert. Bei einer (111)-Orientierung existieren in der Ebene 6 physikalisch gleichwertige Ellipsen konstanter Elektronenenergie (sechsfache Entartung), bei einer (100)-Orientierung entstehen zwei Gruppen von Ellipsen, eine vierfache entartete und eine davon verschiedene zweifach entartete. Da die Elektronenenergie eine homogene quadratische Form der Elektronenimpulse und diese ihrerseits der Teilchenmasse, die in die Bewegungsgleichungen eingeht und

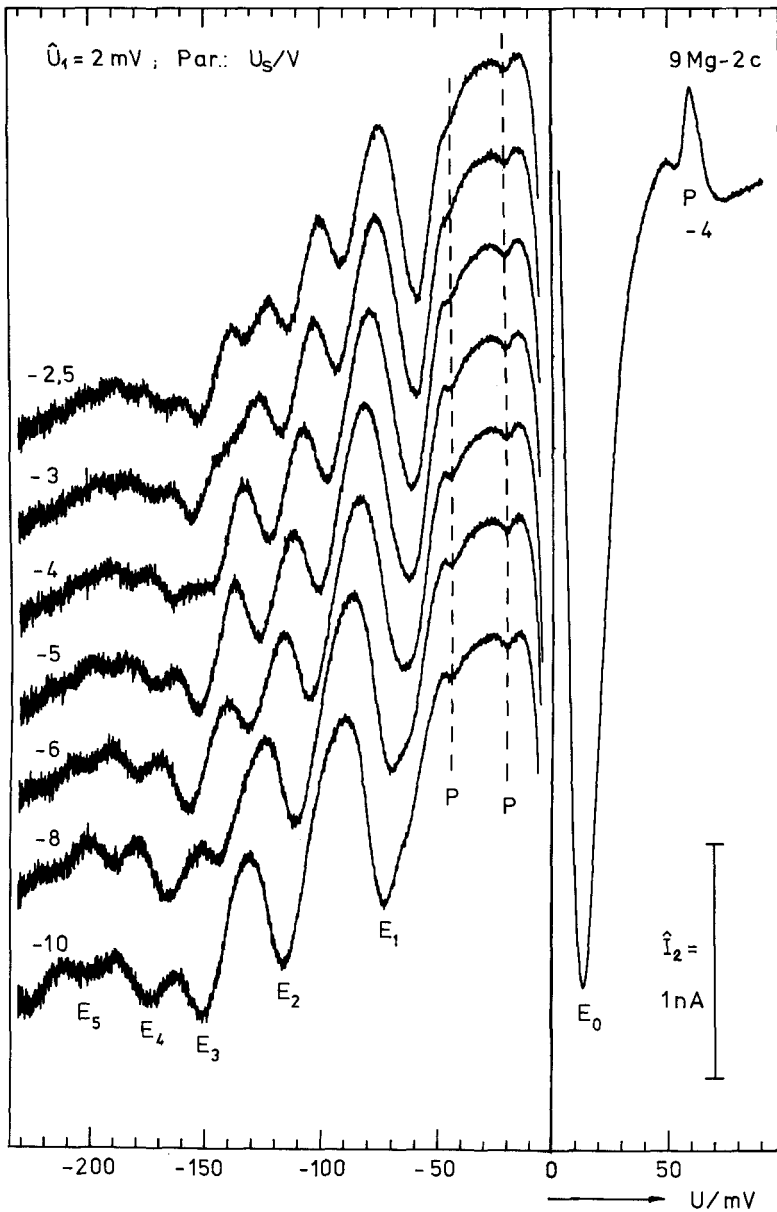


Bild 9:  
Fortsetzung von Bild 8.

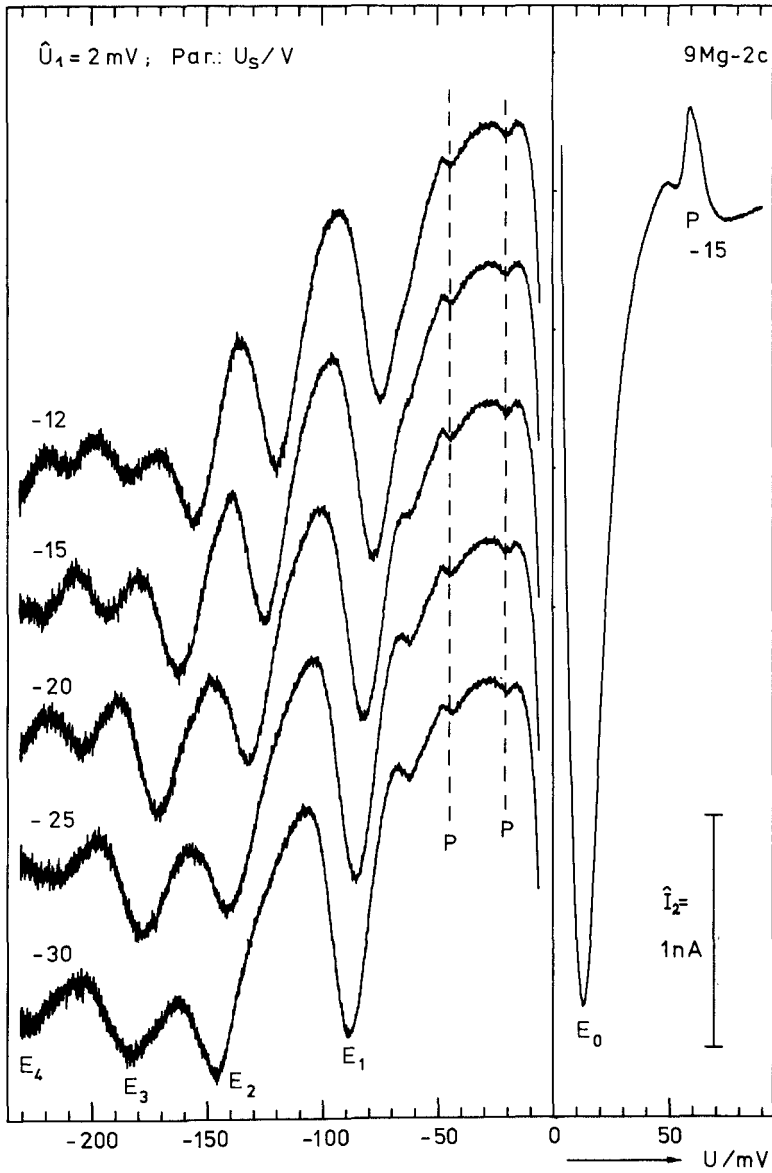


Bild 10:  
Fortsetzung von Bild 8 und 9.

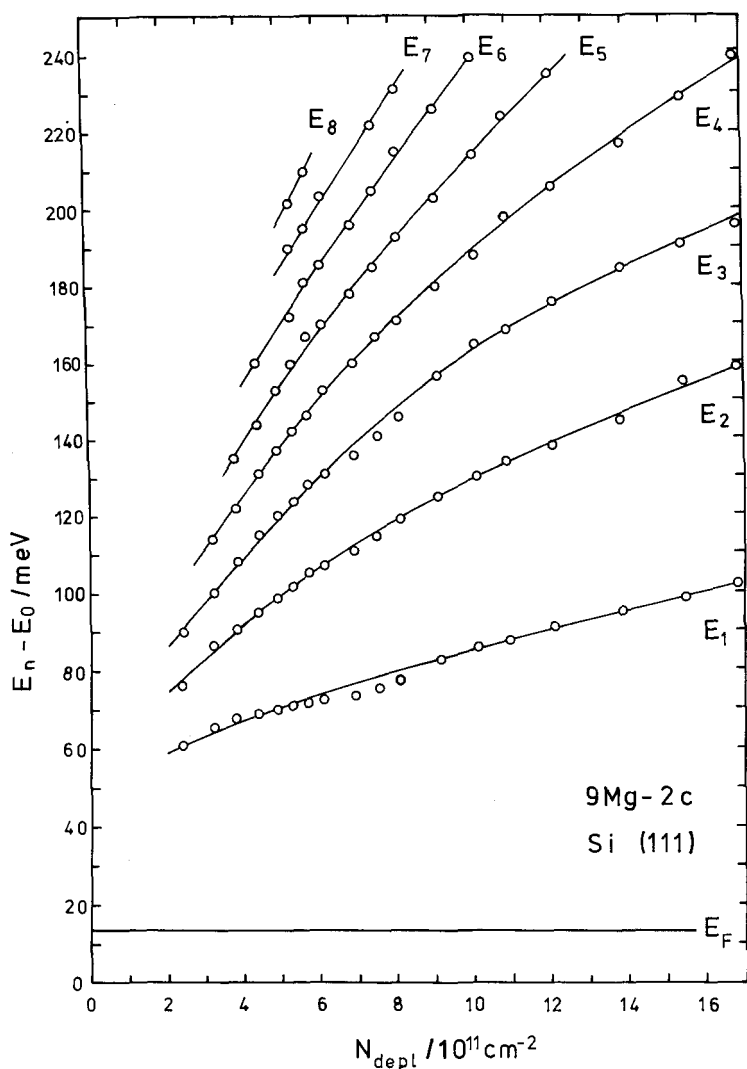


Bild 11:

Auf das niedrigste Subband ( $E_0$ ) bezogene Subbandkantenenergien der Probe von Bild 7 als Funktion der Verarmungsladungsdichte  $N_{\text{depl}}$  nach [5].  $T = 4,2 \text{ K}$ .

wegen der Gitterkräfte von der Ruhmasse abweicht, reziprok proportional ist, wird verständlich, daß der Abstand eines Ellipsoidpunktes von seiner Mitte ein Maß für diese effektive Elektronenmasse ist. Während die Ellipsoidabmessungen für die (111)-Orientierung in Richtung senkrecht zu (111), also in Richtung des Tunnelstromes bei allen 6 Teilflächen gleich sind, muß man in der (100)-Orientierung den Elektronen auf den

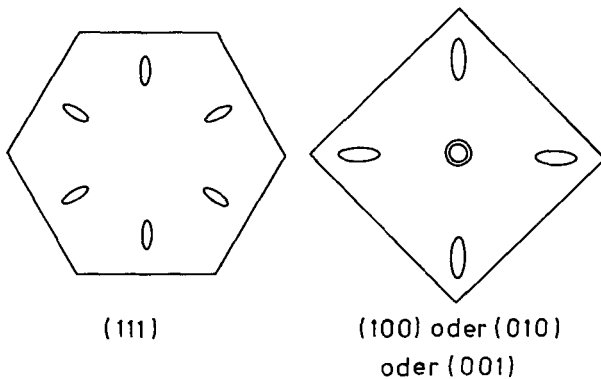


Bild 12:

Linien konstanter Elektronenenergie innerhalb der zweidimensionalen Brillouinzone für n-Si mit (111)- bzw. (100)-Orientierung [7].

beiden mittleren Ellipsoiden eine größere Masse zuordnen als den Elektronen auf den 4 anderen Teilflächen, da die Tunnelstromrichtung zur größten Achse der mittleren Ellipsoide parallel ist. Diese Massen sind ihrerseits auch noch größer als die der Elektronen für den Austritt in [111]-Richtung.

Berücksichtigt man die früher erwähnte De Broglie-Beziehung (Wellenlänge  $\sim 1/(mv)$ ) und das daran anschließend entwickelte Modell der Einlagerung der Elektronen in den Randschichtpotentialtrichter, rutschen die Teilchen mit der größeren Masse, also mit scheinbar kleinerem „Durchmesser“, tiefer herunter. Als Folge dieser Überlegungen wird man in der (100)-Grenzflächenorientierung eine Aufspaltung des Leitungsbandes in zwei verschiedene Subbandleitern  $E_0, E_1 \dots E_n$ , zweifach entartet, den mittleren Ellipsoiden korrespondierend, und  $E_0', E_1', \dots E_n'$ , vierfach entartet, den äußeren Ellipsoiden zugehörig, erwarten. Der Zustandsdichteverlauf von Bild 3b wird gemäß Bild 13 modifiziert; die „gestrichenen“ Subbänder haben wegen des höheren Entartungsgrades eine größere Zustandsdichte. Eine genauere theoretische

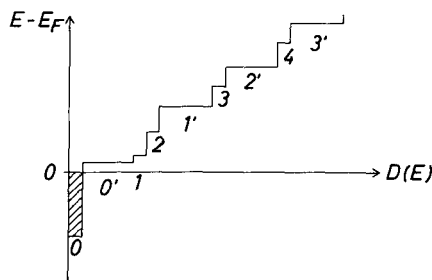


Bild 13:

Zusammenhang zwischen der flächenbezogenen elektronischen Zustandsdichte  $D(E)$  einer Inversionsschicht und den Kantenenergien der Subbänder, relativ zur Fermi-Energie  $E_F$  für Inversionsschichten parallel zu (100)-Grenzflächen [7].



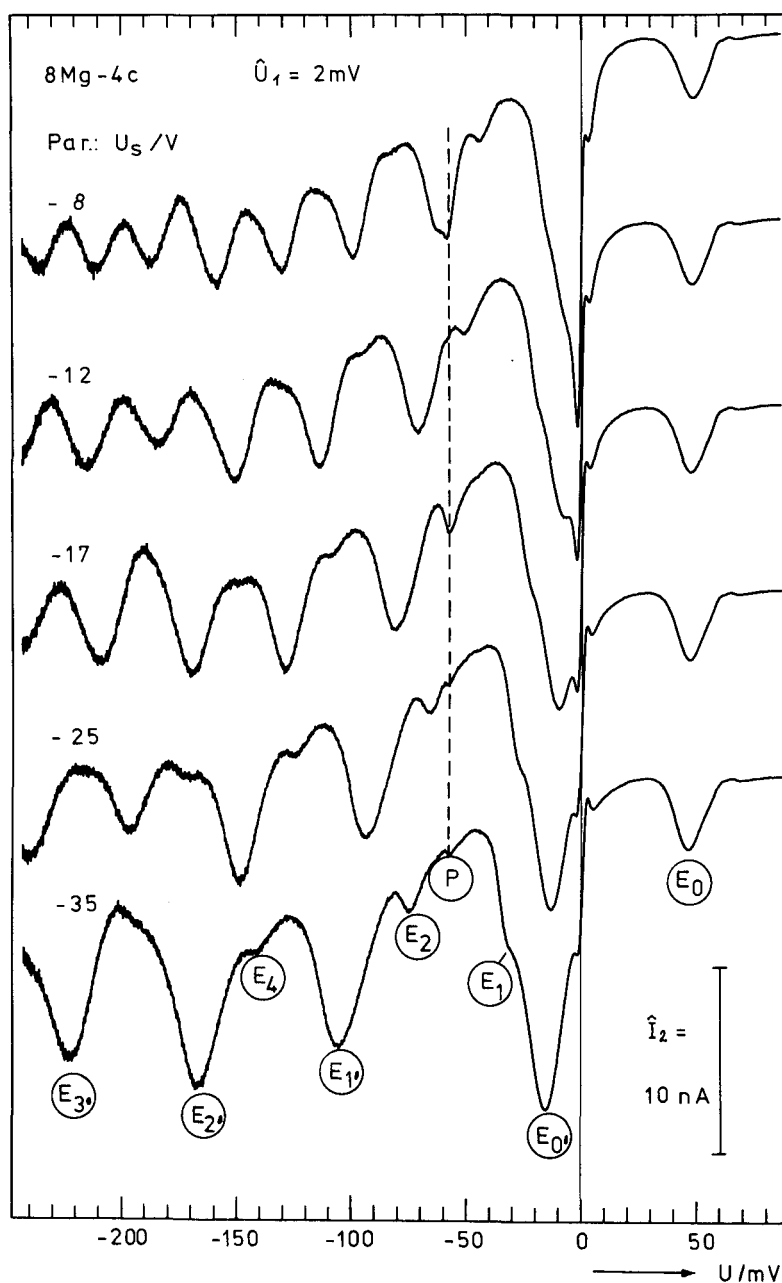


Bild 14:

Spannungsabhängigkeit der zweiten Ableitung der Strom-Spannungskennlinien einer Si-Probe mit einem Inversionskanal parallel zu einer (100)-Fläche nach [2]. Parameter: Substratspannung  $U_s$ ,  $I_2$  vgl. Bild 8,  $P \triangleq$  phononenbedingte Struktur,  $T = 4,2$  K.

Analyse ergibt zudem, daß die Tunnelwahrscheinlichkeit für die „gestrichenen“ Subbänder auch noch aus anderen physikalischen Gründen begünstigt wird [2], so daß sich die  $E_n$ -Werte in den  $d^2I/dU^2$ -Kennlinienfeldern stärker abzeichnen werden als die  $E_n$ -Minima.

Bild 14 zeigt ein Beispiel für eine (100)-Orientierung mit der Substratspannung  $U_s$  als Parameter und der Kennzeichnung der niedrigsten Subbänder [2]. Bild 15 enthält analog zu Bild 11 die Subbandkantenenergien als Funktion der Verarmungsladung [2,5]. Offensichtlich sind Überdeckungen von  $E_n$  und  $E_{n'}$  wegen der großen Breite der beobachteten Minima nicht aufzulösen und tatsächlich vorhanden, z.B.  $E_2$  und  $E_5, E_{1'}$  und  $E_3$ .

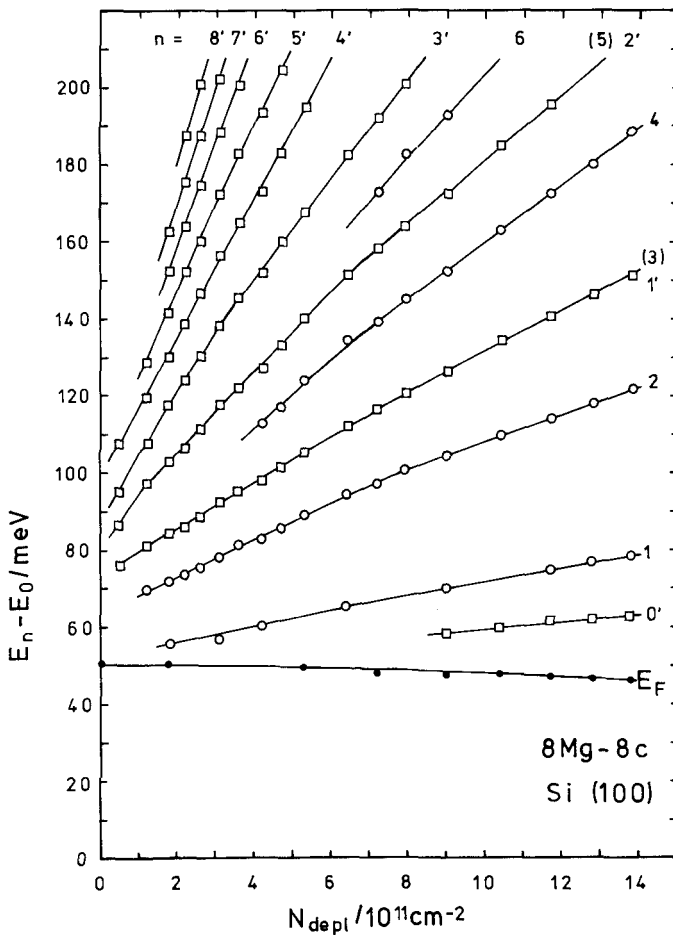


Bild 15:

Auf das niedrigste Subband ( $E_0$ ) bezogene Subbandkantenenergien der Probe von Bild 14 als Funktion der Verarmungsladungsdichte  $N_{depl}$  nach [2, 5].  $T = 4,2 \text{ K}$ .

Um die vorgenommene Auswertung experimentell abzusichern, sind zusätzliche Informationen erforderlich oder mindestens erwünscht. Herr Justi pflegte in solchen Situationen seinen Mitarbeitern drei Ratschläge zu geben: Anwendung tiefer Temperaturen (erfolgte hier schon!), Einsatz eines starken Magnetfeldes und Beeinflussung der Beobachtungsergebnisse durch mechanische Verspannungen. Daß Versuche in einem hinreichend starken Magnetfeld durchgeführt werden konnten, ist zudem Herrn Justi zu danken, der sich bleibende Verdienste um die Einrichtung der Braunschweiger Hochmagnetfeldanlage erworben hat. Bild 16 läßt für eine  $d^2I/dU^2$ -Kennlinie einer (100)-Si-Probe erkennen, daß ein Magnetfeld parallel zur Halbleitergrenzfläche und

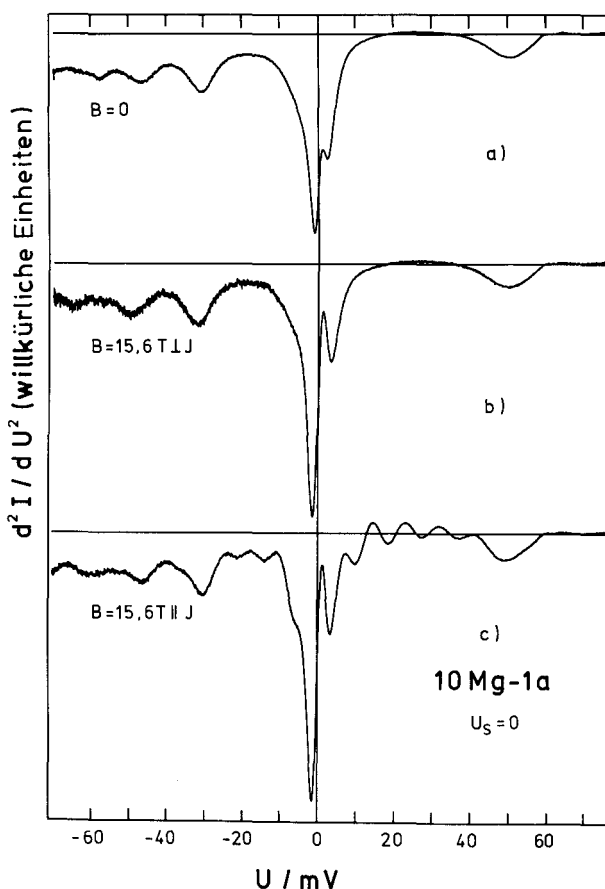


Bild 16:

Spannungsabhängigkeit der zweiten Ableitung  $d^2I/dU^2$  der Strom-Spannungskennlinien einer Probe mit einem Inversionskanal auf einer (100)-Si-Fläche. a) ohne Magnetfeld, b) mit Magnetfeld der Flußdichte 15,6 T senkrecht zum Tunnelstrom, c) wie b), jedoch parallel zum Tunnelstrom nach [9].  $T=4,2$  K.

damit senkrecht zum Tunnelstrom erwartungsgemäß keine neuen Strukturen erzeugt, aber in der Orientierung senkrecht zur Grenzfläche, parallel zum Tunnelstrom für  $U > 0$  neue Oszillationen auftreten. KUNZE und LAUTZ konnten nachweisen [9], daß hier die Einwirkung einer senkrecht zum Magnetfeld erfolgenden Quantisierung der Elektronenbewegung im untersten Subband vorliegt, die zu stoßverbreiterten Landau-Niveau's führt, aus deren energetischem Abstand  $\hbar\omega_c$  mit  $\omega_c = eB/m_c$  die Zyclotron-Masse  $m_c$  ermittelt werden kann, die innerhalb der Meßgenauigkeit mit dem aus der Zustandsdichte bestimmaren Massenwert  $m_d$  übereinstimmt. Da die hier benötigten Zusammenhänge dem Fremdfachmann nur schwer plausibel zu machen sind und die Magnetfeldmessungen keine weitere Hilfe zur Identifikation der Subbandleitern gegeben haben, sollen die Magnetfeldeinflüsse an dieser Stelle nicht näher erläutert werden, vgl. [9].

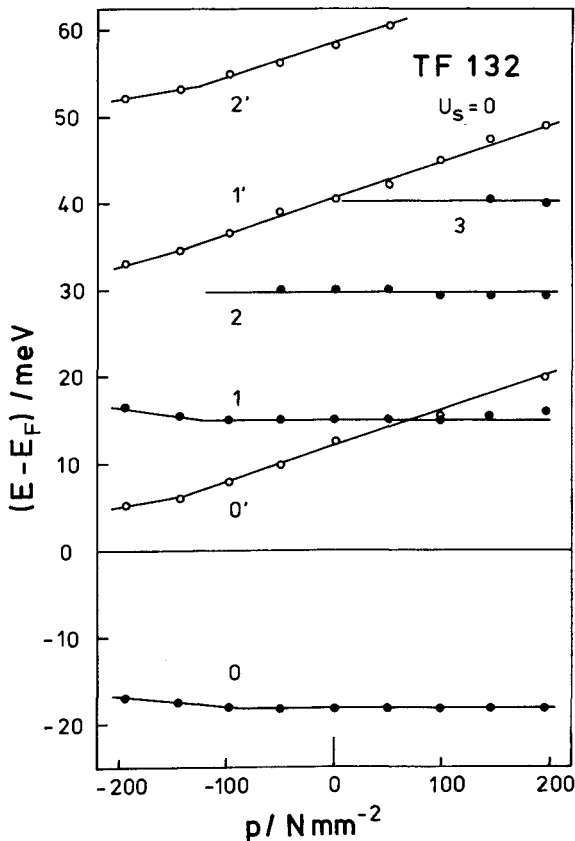


Bild 17:

Subbandkantenenergien (relativ zum Fermi-Niveau  $E_F$ ) einer Si-Probe in (001)-Flächenorientierung als Funktion einer uniaxialen mechanischen Druckspannung ( $p > 0$ ) und Zugspannung ( $p < 0$ ) in [110]-Richtung.  $T = 4,2$  K, Substratspannung  $U_S = 0$ .

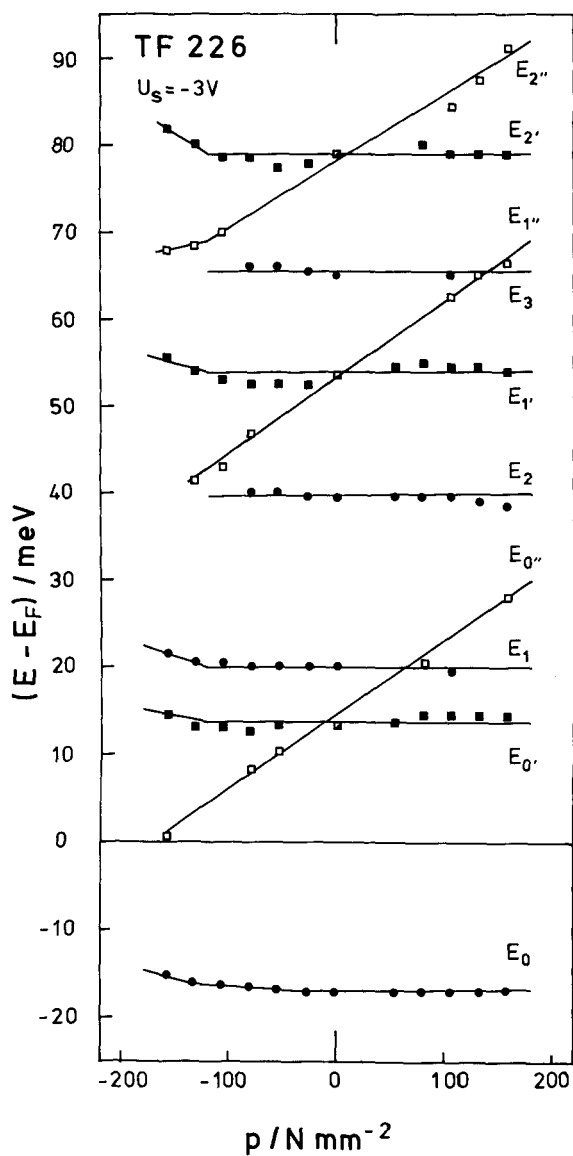


Bild 18:

wie Bild 17, jedoch mechanische Verspannung in  $[100]$ -Richtung. Substratspannung  $U_S = -3 V$ ,  
 $T = 4,2 K$ .

Bezüglich der Entartung und eventuell weitergehenden Aufspaltung von Subbändern haben sich Versuche mit uniaxialer mechanischer Verspannung  $p$  ( $p > 0$ : Druck,  $p < 0$ : Zug) in einer eigens für diese Untersuchungen konzipierten Probenanordnung nach BEHNEN [10] als hervorragend geeignet erwiesen. Legt man die mechanische Beanspruchung in  $[110]$ -Richtung an und ist die Halbleitergrenzfläche parallel zu  $(001)$ -Ebenen orientiert, werden die inneren Energieellipsoide sich anders verhalten als die äußeren; in Bild 12 würde die Achse der mechanischen Spannung unter  $45^\circ$  von links unten nach rechts oben verlaufen. Eine genauere Analyse des Spannungszustandes führt zu der Aussage, daß die  $E_n$ -Werte (innere Ellipsoide) unbeeinflusst bleiben sollten, während die  $E_n'$ -Werte über eine Scherdeformation energetisch verschoben werden. Bild 17 bestätigt diese Voraussage und zeigt zudem, daß für  $p = 0$  zufällig zusammenfallende  $E_n$  und  $E_n'$  (z.B.  $E_1$  und  $E_3$ ) nunmehr getrennt werden können und die in Bild 15 vorgenommene Identifizierung zu recht besteht.

Wählt man für die mechanische Verspannung die  $[100]$ -Richtung, würde in Bild 12 die Spannungsachse z.B. senkrecht von oben nach unten verlaufen, so ist für die Ellipsoidpaare in der Vertikalen und in der Horizontalen die Beanspruchung unterschiedlich. Wiederum kann man modellmäßig überlegen, daß die inneren und die in der Horizontalen liegenden Ellipsoide unveränderte Kantenenergien liefern, während sich die Energiewerte der in der Senkrechten des Bildes 12 liegenden Ellipsoide verschieben. Das bedeutet: Die Leiter der bei  $p = 0$  vierfach entarteten  $E_n'$ -Werte spaltet in zwei zweifach entartete Leitern auf, wobei die verschobenen E-Werte mit  $E_n''$  gekennzeichnet werden. Bild 18 macht deutlich, in welcher Weise diese Aufspaltung im Experiment erfolgt [10].

Die zu  $p$  lineare Verschiebung der Energiewerte ermöglicht die quantitative Bestimmung einer Materialgröße, der Scherdeformationspotentialkonstanten; für Si erhält man aus den vorliegenden Versuchen einen Wert von 8,6 eV, der ausgezeichnet mit den Ergebnissen anderer Autoren (Piezowiderstand, optische Untersuchungen) für das kompakte Si-Volumen übereinstimmt. Damit ist durch die Tunnelstrommessungen erstmalig gezeigt, daß sich das mechanische Verhalten der Halbleiterrandschichten von dem des Volumens nicht unterscheidet.

Bild 19 enthält die zu Bild 18 korrespondierenden  $d^2I/dU^2$ -Kennlinien mit der bei einer Biegevorrichtung angewandten Kraft als Parameter; 0,6 N entsprechen bei der benutzten Apparatur ungefähr 160 N/mm<sup>2</sup> [11]. Der Pfeil an der Kurve für 0,6 N weist auf das vom  $E_1$ -Niveau deutlich getrennte  $E_{0''}$ -Niveau hin. – Die mechanische Verspannung erweist sich also als ein außerordentlich nützliches methodisches Hilfsmittel der Tunnelspektroskopie.

Alle beschriebenen Untersuchungen haben auch einen praktischen Aspekt: So sind genauere Informationen über den Potentialverlauf in Randschichten und in Heterostrukturen, die neue Arten von elektronischen Bauelementen versprechen, von ebenso großer Bedeutung wie Quantisierungseffekte in den kleinsten Strukturen der Mikroelektronik.

Dennoch macht auch die Beschäftigung mit der grundsätzlichen Klärung physikalischer Vorgänge und Mechanismen Freude – wie Herr Justi in dem zitierten Vor-

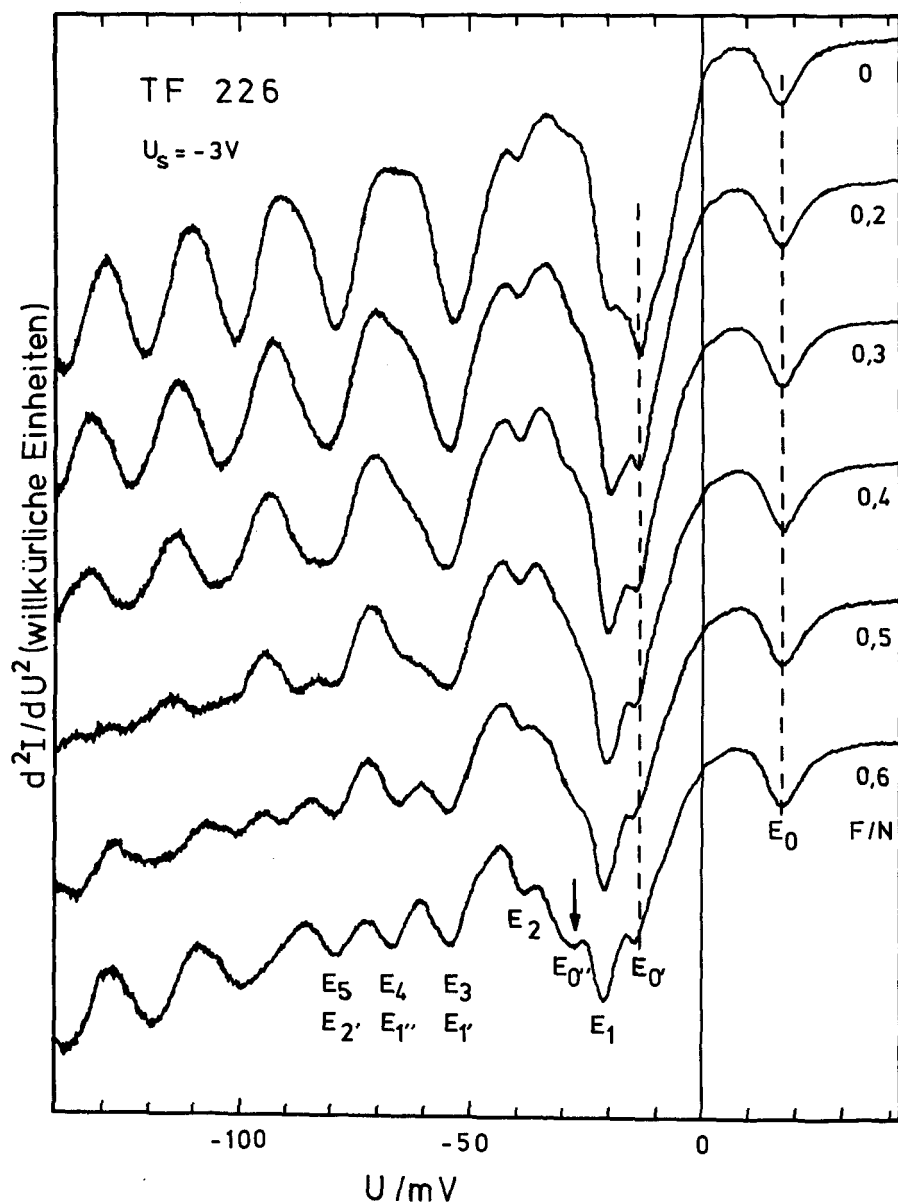


Bild 19:

Kennlinienfeld der zweiten Ableitung des Stromes nach der elektrischen Spannung  $d^2I/dU^2$  für eine Si-MOS-Probe mit Grenzflächen parallel zur (001)-Orientierung nach [11]. Parameter: Uniaxialer Druck in [100]-Richtung. (Eine Kraft  $F$  von 0,6 N entspricht etwa  $160 \text{ N/mm}^2$ ). Substratspannung  $U_s = -3 \text{ V}$ ,  $T = 4,2 \text{ K}$ .

wort seines Buches feststellt [1]. So fühlen sich seine Schüler in seiner Tradition. „Das Sichwundern ist ein Götterfunke, der den Denker im unaufhörlichen Rausch des Schauenden durch die Welt treibt“ (Ortega y Gasset). Man könnte ergänzen „durch die Welt der Physik“, „durch die Welt, der Justi's Wirken galt und die der Inhalt seines Lebens ist“.

### Danksagungen

Die präparativen und experimentellen Untersuchungen wurden von meinen Mitarbeitern Dr.-Ing. Ulrich Kunze und Dipl.-Ing. Erwin Behnen durchgeführt. Beiden Herren danke ich für anregende Diskussionen. Die Deutsche Forschungsgemeinschaft und die Akademie der Wissenschaften und der Literatur, Mainz, haben Teilaspekte der in dieser Arbeit angesprochenen Fragestellungen durch Sachbeihilfen in dankenswerter Weise gefördert.

### Literatur

- [1] JUSTI, E.: Leitfähigkeit und Leitungsmechanismus fester Stoffe. Vandenhoeck und Ruprecht, Göttingen 1948.
- [2] KUNZE, U.: Tunnelspektroskopie von Subbändern des Leitungsbandes in Silizium-Raumladungsrandschichten. Dissertation, T.U. Braunschweig 1982.
- [3] TSUI, D. C.: Electron Tunneling Studies of a Quantized Surface Accumulation Layer. Phys. Rev. B **4** (1971), 4438–4449.
- [4] TSUI, D. C., KAMINSKY, G., SCHMIDT, P. H.: Tunneling Study of Surface Quantization in n-PbTe. Phys. Rev. B **9** (1974), 3524–3531.
- [5] KUNZE, U., LAUTZ, G.: Tunneling Spectroscopy of Subband Structure in n-Inversion Layers on (111) and (100) Si Surfaces. Surf. Sci. **113** (1982), 55–68.
- [6] KUNZE, U., LAUTZ, G.: Tunneling Spectroscopy of Electron Space Charge Layers on (111)-Si. Solid State Comm. **42** (1982), 27–30.
- [7] KUNZE, U.: Tunnel Spectroscopy of Electron Subbands on Si. J. Phys. C (Solid State Phys.) **17** (1984), 5677–5694.
- [8] ALTWEIN, M., FINKENRATH, H.: The Measurement of Calibrated Current-Voltage-Characteristics up to the Second Derivative. J. Phys. E (Sci. Instrum.) **6** (1973), 770–774.
- [9] KUNZE, U., LAUTZ, G.: Tunneling Spectroscopy of Landau-Levels in Electron Inversion Layers on (100) Si-Surfaces. Surf. Sci. **142** (1984), 314–321.
- [10] BEHNEN, E.: Tunnelspektroskopie von Elektronensubbändern auf (100)-Si-Flächen an MOS-Strukturen bei uniaxialer mechanischer Verspannung. Diplomarbeit, T.U. Braunschweig 1983.
- [11] KUNZE, U., LAUTZ, G., BEHNEN, E.: Tunneling Studies of Uniaxially Stressed (001) Si Inversion Layers. Proc. Internat. Conf. on the Phys. of Semiconductors, San Francisco, Aug. 1984, 385–388.